

УДК 538.9

ОЦЕНКА КРИТИЧЕСКОГО РАДИУСА ДИСЛОКАЦИОННЫХ ПЕТЕЛЬ В СУЛЬФИДЕ ЦИНКА

Мозжерин А.В.

Научный руководитель – профессор Логинов Ю.Ю.

Сибирский федеральный университет

Сульфид цинка (ZnS) входит в группу полупроводниковых материалов типа A_2B_6 . Эти стратегические материалы активно используются в современных наносистемах.

Известно, что в отличие от кремния или германия, сульфид цинка имеет гораздо больше структурных дефектов, причем разнообразных и более крупных размеров, что несомненно связано с низким значением ЭДУ. Структурные дефекты влияют на свойства полупроводниковых приборов. Например, при большой возрастающей плотности тока, протекающей через прибор, изготовленный на основе соединений A_2B_6 происходит его деградация [1], причиной которой становятся структурные дефекты, которые образовались и развились в данных материалах. Поэтому изучение закономерностей формирования структурных дефектов в материалах группы A_2B_6 , а также анализ ЭДУ данных материалов в целях разработки методов снижения плотности дефектов или полного их устранения при различных технологических режимах обработки материала является актуальным.

Результаты исследований формирования дефектов в ZnS показали, что после выращивания или после отжига в вакууме легирующая примесь находится в решетке матрицы в виде твердого раствора, а дефекты представляют собой ростовые дислокации и дефекты упаковки (рис. 1, 1.2). Появление примесных преципитатов обнаружено только после отжига в атмосфере цинка (рис. 1, 2). Это говорит о том, что в процессе отжига в атмосфере Zn легирующая примесь вытесняется атомами цинка из узлов в междоузлия, что обуславливает миграцию In или Ga, используемых как легирующая примесь, на места нарушений структуры (например, дислокации или дефекты упаковки), где происходит распад пересыщенного раствора и формирование преципитатов. Все это сопровождается трансформацией ростовых дислокаций и образованием дислокационных петель, что необходимо для снятия упругих напряжений в массиве кристалла.

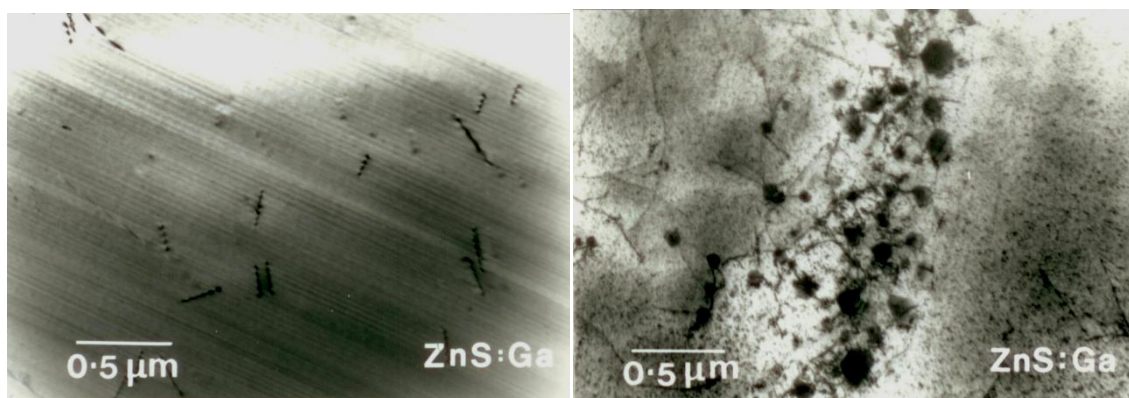


Рис. 1. Дефекты микроструктуры в ZnS:Ga, сразу после выращивания (слева), преципитаты украшающие дефект упаковки в ZnS:Ga, отожженный в цинковом пару (справа) [1].

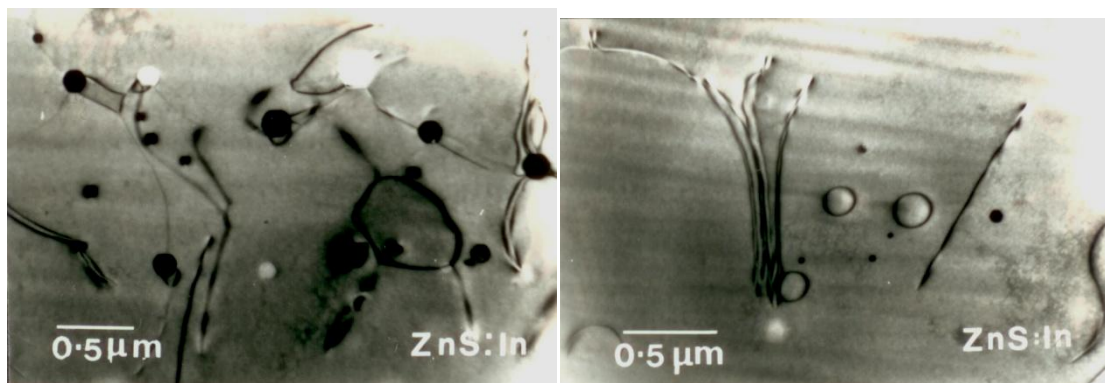


Рис. 2. Преципитаты, украшающие дефект упаковки в ZnS:In, отожженном в цинковом пару (слева), дислокационные петли в ZnS:In, отожженном в цинковом пару. (справа) [1].

Критический радиус дислокационной петли та важная характеристика, которая показывает те точки, после которых происходит качественные и количественные изменения дефектной сети материала. Поскольку в материале, как правило, присутствует большое количество дислокационных петель, размеры которых весьма различны, но при достижении определенного значения радиуса, который носит название «критический» дислокационной петли (r_{crit}), происходят резкие изменения в плотности дислокации петель радиусов больше, чем r_{crit} , эти радиусы своеобразные реперные точки. Как правило, в любом полупроводниковом материале одно-два значения r_{crit} , в других материалах, например, в металлах их может быть и больше. Нами предполагается, что значение «критического» радиуса дислокационной петли есть мера дефектостойкости сульфида цинка.

«Критический» радиус также связан с ЭДУ согласно классической модели описания энергии процесса образования петель Франка [2]. Поскольку петли Франка присутствуют в сульфиде цинка, мы можем использовать классическую модель и в нашем исследовании.

Механизмы образования петли Франка в кремнии, германии и арсениде галлия схожи с процессами формирования петель Франка описанными в работе [2] в этом случае получаем из формулы (2.14) аналогичную для материалов нашего исследования:

$$E_{(l, perfect)} = E_{(SF)} + E_{(l, Frank)} \quad (1)$$

Где: $E_{l, perfect}$ – общая энергия образования дислокационной петли; E_{SF} – энергия дефекта упаковки дислокационной петли; $E_{l, Frank}$ – упругая энергия дислокационной линии.

Расписывая каждую энергию по формулам получаем для наших материалов связь между критическим радиусом (r_{crit}) и энергией дефекта упаковки (γ) как:

$$\gamma = \frac{\mu a^2}{24\pi r_{crit}} \frac{2+\nu}{(1-\nu)} \left[\ln \left(\sqrt{6} \frac{\alpha r_{crit}}{a} \right) \right] \quad (2)$$

Формула 2 не совсем точна, поскольку классическая модель описания энергии процесса образования петель Франка, не учитывает, что при таком процессе образование вакансионной петли Франка происходит путем формирования частичных дислокаций Шокли, что является наиболее энергетически выгодным. Поэтому с учетом вклада от образования петель Шокли формула (4.1) приобретает вид:

$$E_{(l,perfect)} = E_{(SF)} + E_{(l, Frank)} + 2E_{(Shockley)} \quad (3)$$

В итоге получаем полное уравнение для ЭДУ:

$$\gamma = \frac{\mu a^2}{4800\pi r_{(crit)}(1-\nu)} \left[400\nu \ln\left(\frac{\alpha r_{(crit)}}{a}\right) + 32 + 343\nu \right] \quad (4)$$

Результаты исследований приводятся в таблице 1:

Таблица 1. Значения r_{crit} для ряда полупроводников «обобщенная модель»

| Материал | Параметр решетки, нм | Коэфф. Пуассона | Модуль сдвига, ГПа | ЭДУ, мДж/м ² | «Критический» радиус, нм | |
|----------|----------------------|-----------------|--------------------|-------------------------|--------------------------|---------------------------------|
| | | | | | Класс. модель | Класс. модель с уч. дисл. Шокли |
| ZnS | 0.541 | 0.38 | 21.7 | 5-6 | 332 - 413 | 110 – 136 |
| | | 0.28 | 26.3 | | | 82 – 101 |

Полученные значения «критического» радиуса дислокационных петель подтверждаются экспериментальными результатами, полученными методами просвечивающей электронной микроскопии. Также видно, что материал сульфид цинка, имеющий самую низкую ЭДУ, среди полупроводников A_2B_6 имеет самую высокую плотность и разнообразие структурных дефектов, а размеры дислокационных петель могут достигать значений на несколько порядков превышающие аналогичные размеры в других материалах. В целом строго выполняется тенденция зависимости радиуса дислокационных петель от ЭДУ.

Литература

1. Логинов, Ю.Ю. Закономерности образования структурных дефектов в полупроводниках A_2B_6 : науч. изд. / Ю. Ю. Логинов, Браун Пол Д., Дьюроуз Кен. – М.: Логос, 2003. – 304 с.
2. Herrera, M. Unfaulting of dislocation loops in the GaInNAs alloy: An estimation of the stacking fault energy / M. Herrera, D. González, J. G. Lozano, R. García, M. Hopkinson, H. Y. Liu, M. Gutierrez, P. Navaretti // Applied Physics Letters. – 2005. – Vol. 98, 023521. – P. 1–7